



TITLE:

# s-d singlet stateにある標的による 電子の散乱 I

AUTHOR(S):

川村, 清

---

CITATION:

川村, 清. s-d singlet stateにある標的による電子の散乱 I. 物性研究 1971, 15(5): 335-350

ISSUE DATE:

1971-02-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/88200>

RIGHT:

# s-d singlet state にある 標的による電子の散乱 I

東大理 川 村 清

(1月7日受理)

## Abstract

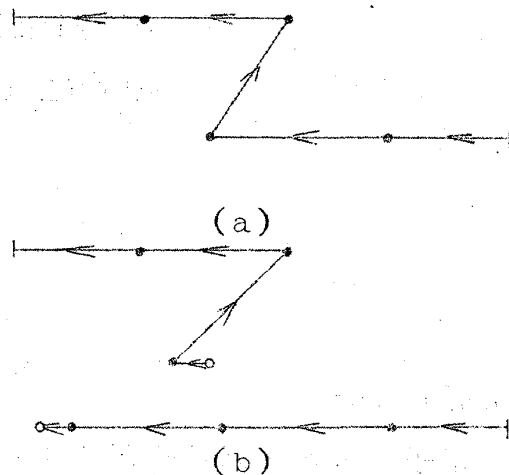
電子ガスと1個の局在スピンの1重項状態にあると仮定する。その標的に電子をあてたときのt-行列の正常部分への寄与を考察する。中間状態のうち散乱電子と3重項または励起された1重項とからなる過程からt-行列の虚部への寄与は  $|\omega| \leq k T_K = |\tilde{E}|$  では0である。一方励起された標的と電子との束縛状態が生ずるが、このような中間状態からの寄与も weak coupling limit の近似では消える。いずれにせよ  $\omega=0$  で、いわゆる unitarity limit は与えない。

## § 1 Introduction

s-d 交換相互作用で結ばれる電子ガスと局在スピンとからなる系の基底状態は Yosida によって提案された<sup>1)</sup> 1重項状態を作っているとする。この1重項状態にある標的に外から入れた電子をぶつけたときの応答は、電子グリーン関数あるいはt-行列によって与えられる。この電子グリーン関数は2つの部分に分割されることが判っている<sup>2), 3)</sup>。それに応じてt-行列も2つの部分(正常部分と異常部分)に分れる。正常部分とは入射電子が標的と相互作用した後、散乱されて遠方へ去るという過程(直接散乱過程)からの寄与であり、異常部分とは入射電子が標的のところに束縛されている電子と交換して出て行く過程(交換散乱過程)からの寄与である。

これら2つの過程は、筆者が電子グリーン関数を Goldstone diagram を使って議論したときに発見した。グラフで定義すれば外から入って来る電子線が再び外に出て消えるというグラフからの寄与が Green 関数の正常部分であり、外から入って来た電子線が途中で消え、途中で生じた電子線が外へ出て行くというグラフからの寄与が異常部分である。(第1図)

第1図に出て来る白い丸は  $s-d$  singlet state からの励起を考える際に出て来る独特の要素である。 $s-d$  交換相互作用を摂動とすると、非摂動系の固有状態は ( $S=1/2$  として) 2重の縮退をしている。これから  $s-d$  相互作用を摂動として入れていっても決して1重項状態には到達しえないので、摂動計算の出発点は



第 1 図

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{p > p_0} \Gamma_p (a_{p\downarrow}^+ \alpha^+ - a_{p\uparrow}^+ \beta^+) |\Phi_F\rangle \quad (1.1)$$

と、とらなくてはならない。ここで  $|\Phi_F\rangle$  は Fermi 真空である。ところで通常のグラフ法では  $p > p_0$  では  $a_p |\psi_0\rangle$  が、また  $p < p_0$  では  $a_p^+ |\psi_0\rangle$  が消えるという事実に基づいている。<sup>4)</sup> ところが摂動の出発点として (1.1) の形をとると、この性質が満たされず、「おつり」の項が出て来る。その「おつり」の項の寄与が第1図の白丸で表わされる。<sup>5)</sup>

こうなると Suhl<sup>5)</sup>, Nagaoka<sup>6)</sup>, Hamann<sup>7)</sup> の定式化との違いが出て来る。実際、たとえば Duke and Silvrstein<sup>8)</sup> が Suhl 方程式をグラフを使って導びいた際は第1図の白丸や、これに対応するグラフ上の要素はなかった。この論文の目的はこの違いを意識しつつ、特に  $t$ -行列の正常部分の効果を議論しようというのである。

## § 2 正常部分の摂動展開

電子グリーン関数の正常部分と  $t$ -行列の正常部分との関係は

$$G_{pp'}^{(N)}(\omega) = g_p(\omega) \delta_{pp'} + g_p(\omega) T^{(N)}(\omega) g_{p'}(\omega) \quad (2.1)$$

で与えられる。ここで  $g_p(\omega)$  は自由電子の Green 関数

$$g_p(t) = -i \exp(-i\epsilon_p t) [\theta(t)\theta(\epsilon_p) - \theta(-t)\theta(-\epsilon_p)] \quad (2.2)$$

の Fourier 変換である。(2.1) に出て来た  $T^{(N)}(\omega)$  は

$$T^{(N)}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') \exp[i\omega(t-t')] T^{(N)}(t-t') \quad (2.3)$$

で定義される。ここに<sup>3)</sup>

$$\begin{aligned} T^{(N)}(t-t') = & - \sum_{n=2}^{\infty} (-J/N)^n \int \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 \cdots dt_{n-2} \\ & \times g(t-t_1) g(t_1-t_2) \cdots g(t_{n-2}-t') \\ & \times \ll (S \cdot \sigma)_{\alpha\alpha_1}(t), (S \cdot \sigma)_{\alpha_1\alpha_2}(t_1), \cdots, \\ & (S \cdot \sigma)_{\alpha_{n-2}\alpha_{n-1}}(t_{n-1}), (S \cdot \sigma)_{\alpha_{n-1}\alpha}(t') \gg \end{aligned} \quad (2.4)$$

である。ただし、 $g(t) = \sum_p g_p(t)$  を導入した。

(2.4) の形は筆者が Nagaoka-Hamann 方程式を導びく際に使ったものであるが、問題<sup>9)</sup>はここに出て来たスピン演算子の Green 関数の計算法である。文献 9) ではこのスピン Green 関数に対する運動方程式を作り、その解がある積分方程式を満たすことから Hamann 方程式を出した。その際重要な仮定としてスピン演算子と全ハミルトニアンとの交換子を無視した。その仮定の当否を調べるために (2.4) で  $n=2$  の項を調べると

$$\begin{aligned} T^{(N^2)}(t-t') = & -(J/N)^2 g(t-t') \\ & \times \sum_n \exp\{-iE_n(t-t')\} \\ & \times \{ \theta(t-t') \langle 0 | (S \cdot \sigma)_{\alpha\beta} | n \rangle \langle n | (S \cdot \sigma)_{\beta\alpha} | 0 \rangle \\ & + \theta(t'-t) \langle 0 | (S \cdot \sigma)_{\beta\alpha} | n \rangle \langle n | (S \cdot \sigma)_{\alpha\beta} | 0 \rangle \} \end{aligned} \quad (2.5)$$

ここで  $|n\rangle$  は固有値  $E_n$  に属する全ハミルトニアン固有状態である。これを Fourier 変換すると

$$T^{(N2)}(\omega) = (J/N)^2 S(S+1) \sum_{np} |\langle 0|n\rangle|^2 \left[ \frac{1-f(\epsilon_p)}{\omega - \epsilon_p - E_n + i0} + \frac{f(\epsilon_p)}{\omega - \epsilon_p + E_n - i0} \right] \quad (2.6)$$

(2.5) の右辺を見ると  $|n\rangle$  は 3 重項状態であることが判る。実際、基底状態が

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_\downarrow \alpha - \psi_\uparrow \beta)$$

という 1 重項状態であるなら、これにスピン演算子を演算すると、3 重項状態のどれかに変換される。したがって  $E_n$  は基底状態から測った 3 重項状態への励起エネルギーである。ここで  $\sum_n |\langle 0|n\rangle|^2$  を積分  $\int dE A(E)$  で置き換えると (2.6) から

$$\text{Im } T^{(N2)}(\omega) = -\pi \text{sign}(\omega) S(S+1) (J/N)^2 \rho \int_0^{|\omega|} dE A(E) \quad (2.7)$$

を得る。ここで s-電子は一樣な状態密度  $\rho$  を持つと仮定した。

(2.4) で  $n=3$  の項を計算しようと思うと、3 時間スピン Green 関数を計算する必要がある。その際、3 重項に属するハミルトニアンの固有状態にスピン演算子を演算させてできる 3 重項状態は同じ固有値に属する。このことを使うと、

$$T^{(N3)}(\omega) = -(-J/N)^3 S(S+1) \sum_n \sum_p \sum_q |\langle n|0\rangle|^2 \\ \times \left[ \frac{(f(\epsilon_p)-1)(f(\epsilon_q)-1)}{(\omega - \epsilon_p - E_n + i0)(\omega - \epsilon_q - E_n + i0)} + \frac{(1-f(\epsilon_p))f(\epsilon_q)}{(\epsilon_q - \epsilon_p - E_n)(\omega - \epsilon_p - E_n + i0)} \right. \\ \left. - \frac{f(\epsilon_p)(1-f(\epsilon_q))}{(\epsilon_p - \omega - E_n + i0)(\epsilon_p - \epsilon_q - E_n)} + \frac{f(\epsilon_p)(1-f(\epsilon_q))}{(\omega - \epsilon_q - E_n + i0)(\epsilon_p - \epsilon_q - E_n)} \right]$$

$$\left. - \frac{(1-f(\epsilon_p)) f(\epsilon_q)}{(\epsilon_q - \epsilon_p - E_n)(\epsilon_q - \omega - E_n + i0)} - \frac{f(\epsilon_p) f(\epsilon_q)}{(\epsilon_p - \omega - E_n + i0)(\epsilon_q - \omega - E_n + i0)} \right\} \quad (2.8)$$

を得る。これより

$$\begin{aligned} \text{Im } T^{(N^3)}(\omega) = & -2\pi \left(\frac{J}{N}\right)^3 S(S+1) \rho^2 \text{sign}(\omega) \\ & \times \int_0^{|\omega|} dE A(E) \left\{ \log \left| \frac{\omega}{D} \right| + \log \left| \frac{|\omega| - E}{D} \right| \right\} \end{aligned} \quad (2.9)$$

となる。(2.7) にせよ (2.9) にせよ,  $|\omega| \rightarrow 0$  で電子の寿命は無限に長くなることを示唆している。

ところで、これまでは  $A(E)$  の形については何ら触れなかったがこの量は 2 体のスピン Green 関数を Yosida model にたって摂動計算することによって求められる。その結果は<sup>3)</sup>

$$A(E) = \begin{cases} \rho \Gamma^2(E - |\tilde{E}|) & \text{for } E > |\tilde{E}| \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.10)$$

である。ここで  $\tilde{E} = -k T_K$  で  $\tilde{E}$  は Yosida model による束縛エネルギー,  $T_K$  は Kondo 温度である。この結果を得る過程を見直すと, (すでに知られていることではあるが<sup>10)</sup>) 中間状態の 3 重項状態は

$$a_{p\uparrow}^+ \alpha^+ |\Phi_F\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{p\downarrow}^+ \alpha^+ + a_{p\uparrow}^+ \beta^+) |\Phi_F\rangle, a_{p\downarrow}^+ \beta^+ |\Phi_F\rangle \quad (2.11)$$

という散乱状態であることが判る。(2.10) を見て判るように (2.7) や (2.9) の右辺は  $|\omega| \leq |\tilde{E}|$  では完全に 0 である。

このように  $t$  行列の正常部分の虚部が  $|\omega| \leq |\tilde{E}|$  で消えること理由は明白である。実際、標的がある特定の 3 重項状態に移ったとすると、中間状態はその標的の励起エネルギーとそこに存在する 1 個の電子のエネルギーの和に相当するエネルギーを持っている。ところで、入射電子が標的を励起して

この連続スペクトルの1個に移るためには、入射電子は少くとも  $E$  以上のエネルギーを持っていないとエネルギー保存則を破ぶる。したがってフェルミ面スレスレの小さなエネルギーを持った電子では標的を励起しえず、したがって散乱はおきえない。このことは中間状態が電子2個、正孔1個を含んでいてもいえる。この様な事情はフォノンと相互作用している電子の寿命が  $|\omega| \rightarrow 0$  で小さくなることと全く同じ理由による。

### §3 中間状態についての仮定

ところで中間状態は上のような3重項と電子系の散乱状態だけではない。以下に見るように3重項が縮退していて、しかも(3重項)+(1電子)の状態密度が  $E_{\text{tot}} = E$  のところであるべく切られるということから、3重項と入射電子の束縛状態が出現する。この様な束縛状態の寄与は、これまでのように項別に議論しては出て来ないものであるから、ここで(2.4)の右辺の一般項を議論しなくてはならない。

スピン Green 長数はスピン演算子の積を基底状態での期待値をとることによって定義された。前述のように1重項基底状態にスピン演算子を作用させると3重項が出来る。多数の3重項のうちあるエネルギー  $E_\ell$  を持った3重項が出来たとしよう。すなわち

$$S|0\rangle \propto |\ell\rangle \quad H|\ell\rangle = E_\ell |\ell\rangle \quad (3.1)$$

この3重項状態  $|\ell\rangle$  に再びスピン演算子を作用させると3重項または1重項になり、後者は  $|0\rangle$  になるか、または1重項励起状態になるかである。

3重項  $|\ell'\rangle$  になったときは  $|\ell'\rangle$  のエネルギー固有値は当然  $|\ell\rangle$  の固有値と等しい。しばらくは中間状態で基底状態に戻る可能性は無視する。そうすると中間状態として表われる1重項状態は励起状態ばかりであるが、ここで重要な仮定としてこの励起1重項  $|m\rangle$  は3重項と同じエネルギーを持っているとする。すなわち

$$S|\ell\rangle \propto \begin{cases} |\ell'\rangle & H|\ell'\rangle = E_\ell |\ell'\rangle \quad (\text{厳密}) \\ |m\rangle & H|m\rangle = E_\ell |\ell'\rangle \quad (\text{仮定}) \end{cases} \quad (3.2)$$

この様に仮定することの根拠は次の点にある。(2.11) の 3 重項散乱状態からスピン演算子によって変換されて出来る 1 重項状態は

$$|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{p\downarrow}^+ \alpha^+ - a_{p\uparrow}^+ \beta^+) |\Phi_F\rangle \quad (3.3)$$

であるが、この  $|m\rangle$  のうち  $o(1/N)$  の部分は 1 重項束縛状態に加わるが、大部分は (3.3) の 1 重項散乱状態として残るからである。

以上の考察の結果、次のように結論出来る。すなわち、(2.4) のスピン演算子のハイゼンベルグ表示

$$\begin{aligned} (S \cdot \sigma)_{j,j+1}(t_{j+1}) &= \exp[iHt_{j+1}] (S \cdot \sigma)_{j,j+1} \\ &\quad \times \exp[-iHt_{j+1}] \end{aligned} \quad (3.4)$$

は  $t_{j+1}$  が他の全ての時刻変数より小さいか、あるいは他の全ての時刻変数より大きい場合を除いて、(3.4) の右辺の指数関数は落とせるということである。例外として

$$(S \cdot \sigma)_{j,j+1}(t_{j+1}) = (S \cdot \sigma)_{j,j+1} \exp(-iE_\ell t_{j+1})$$

$$\text{もし } t_{j+1} > t, t_1, t_2, \dots, t_{n-1}, t' \text{ なら } (3.4a)$$

$$(S \cdot \sigma)_{j,j+1}(t_{j+1}) = (S \cdot \sigma)_{j,j+1} \exp(iE_\ell t_{j+1})$$

$$\text{もし, } t_{j+1} < t, t_1, t_2, \dots, t_{n-1}, t' \text{ なら } (3.4b)$$

そこで与えられた時間順序に対して (3.5) の被積分関数は

$$\begin{aligned} &\sum_{\ell \ell'} \langle 0 | (S \cdot \sigma)_{j,j+1} | \ell \rangle \langle \ell | H(TS) | \ell' \rangle \langle \ell' | (S \cdot \sigma)_{k,k+1} | 0 \rangle \\ &\quad \times \exp[-iE_\ell(t_{j+1} - t_{k+1})] g(t - t_1) g(t_1 - t_2) \dots \\ &\quad \dots g(t_{n-1} - t') \end{aligned} \quad (3.5)$$



ここで  $T$ -積中のスピン演算子の時刻依存性は、ただ  $T$ -積を定義することだけに必要なものである。

#### § 4 グラフによる表現

しはらく、 $t > t'$  とする。まず、 $t, t_1, t_2, \dots, t_{n-2}, t'$  のところに黒丸を描く。そうして  $t' \rightarrow t_{n-2}, \dots, t_1 \rightarrow t$  へ走る矢印のついた直線を引く。時刻  $t_j$  のところにある黒丸は  $(S \cdot \sigma)_{j,j+1}(t_j)$  を表わし、 $t_{j+1}$  から  $t_j$  に走る“ $p$ ”というラベルのついた直線は  $\varphi_p(t_j - t_{j+1})$  を表わすものとする。いくつかの簡単なグラフの例を第 2 図に示した。 $p$  という。 $p$  というラベルのある左に向って走る矢印は  $(-i) \exp[-i \varepsilon_p(t_j - t_{j+1})] \theta(\varepsilon_p)$  を表わし、右に向って走る矢印は  $i \exp[-i \varepsilon_p(t_j - t_{j+1})] \theta(-\varepsilon_p)$  を表わす。一番左の黒丸が  $t_{j+1}$  で一番右の黒丸が  $t_{k+1}$  であれば、因子

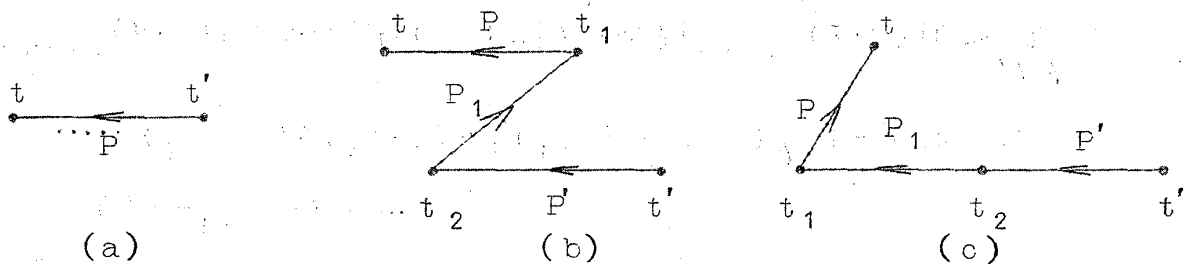
$$\begin{aligned} & \langle 0 | (S \cdot \sigma)_{j,j+1} | \ell \rangle \langle \ell' | (S \cdot \sigma)_{k,k+1} | 0 \rangle \\ & \times \exp[-i E_\ell(t_j - t_k)] \end{aligned}$$

が出て残りの黒丸のスピン演算子は

$$\langle \ell | U(TS) | \ell' \rangle$$

を与える。

次に (3.5) に  $\exp[i\omega(t-t')]$  をかけ、 $t, t_1, \dots, t_{n-2}$  で時刻の順序は動かさないままで積分して  $T^{(N)}(\omega)$  への寄与を求めよう。簡単な考察の後、その積分の結果はやはり第 2 図から読みとれることが判る。ある黒丸と、そのすぐ右側の黒丸の間に 1 本の縦線を引く。



第 2 図

そのような縦線は全部で  $(n-1)$  本引ける。ある縦線が  $p_{\ell 1}, p_{\ell 2}, \dots$  という左向きの電子線と  $p_{r 1}, p_{r 2}, \dots$  という右向きの電子線と交わったとする。その縦線はもし  $t$  と  $t'$  の間にあれば

$$\frac{(-\theta(-\epsilon_{r 1}))(-\theta(-\epsilon_{r 2})) \dots \theta(\epsilon_{\ell 1}) \theta(\epsilon_{\ell 2}) \dots}{\omega - E + \epsilon_{r 1} + \epsilon_{r 2} + \dots - \epsilon_{\ell 1} - \epsilon_{\ell 2} - \dots}$$

という因子を与える。ここで  $\epsilon_{p_{r 1}} = \epsilon_{r 1}$  等々と略記した。 $t$  より左側  $t'$  より右側にあればこの  $\omega$  を落とした因子を与える。これらの  $\theta$  関数とエネルギー分母の各縦線からの寄与の積をシンボリックに書いて、結局 1 つのグラフの  $T(\omega)$  への寄与は

$$\begin{aligned} & \langle 0 | (S \cdot \sigma)_{j, j+1} | \ell \rangle \langle \ell' | (S \cdot \sigma)_{k, k+1} | 0 \rangle \langle \ell | U(TS) | \ell' \rangle \\ & \times (n\theta) \left( n \frac{1}{\sum \epsilon} \right) \end{aligned} \quad (4.1)$$

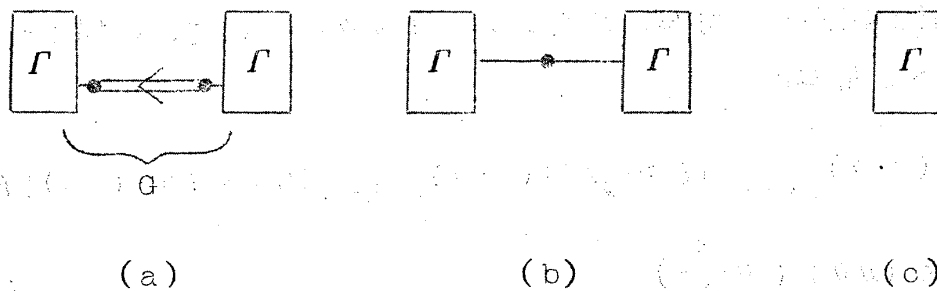
となる。

ここで少しグラフを分解してみよう。まず「孤立した黒丸」を定義する。ある黒丸のすぐ右側とすぐ左側に縦線を引いたとき、その縦線がただ 1 本の電子線と交わるとき、その黒丸を「孤立した黒丸」と称することにする。たとえば第 2 図 c の  $t_2$  の黒丸がそれに相当する。[時刻  $t$  と  $t'$  のところの黒丸は孤立した黒丸にはならない]

多数のグラフの中には孤立した黒丸の全然ないものも、1 個だけのものもあるが、その他 2 つ以上の孤立した黒丸のあるものがある。まず第 3 図 a のように孤立した黒丸が 2 つ以上あるものを考える。いくつかある孤立した黒丸のうち一番左にあるものと、一番右にあるものを取り、その間にはさまれた部分からの寄与を  $G_{\beta r}^{\ell m}(\omega)$ 、一番左の黒丸より左にある部分からの寄与を  $\Gamma_{\alpha \beta}^{0 \ell}(\omega)$ 、一番右の黒丸より右にある部分からの寄与を  $\Gamma_{r \alpha}^{m 0}(\omega)$  とする。そうすると第 3 図 a のような孤立した黒丸が 2 つあるグラフからの寄与の総和は

$$(-J/N)^2 \Gamma_{\alpha\beta}^{0\ell}(\omega, E) \langle \ell | (S \cdot \sigma)_{\beta\tau} | m \rangle \\ \times G_{\tau\delta}^{mn}(\omega, E) \langle n | (S \cdot \sigma)_{\delta\rho} | r \rangle \Gamma_{\rho\mu}^{r0}(\omega, E)$$

という形に書ける。ここで上ツキの添字はグラフ上のその部分にあるスピン演算子の積のどのような標的状态での行列要素であるかを表わし，下ツキの添字はそれらのスピン演算子と対になっている Pauli 行列の行列要素を指定する。今後はこれらの表式は行列の積で書くことにすると，



第 3 図

$$(3a) \rightarrow (-J/N)^2 \Gamma(\omega, E) (S \cdot \sigma) G(\omega, E) (S \cdot \sigma) \Gamma(\omega, E)$$

$$(3b) \rightarrow (-J/N) \Gamma(\omega, E) (S \cdot \sigma) \Gamma(\omega, E)$$

$$(3c) \rightarrow \Gamma(\omega, E)$$

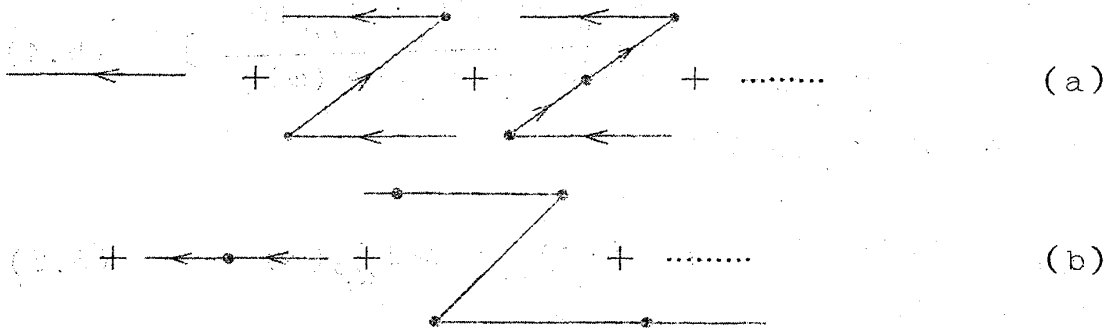
と書ける。そこで

$$T^{(N)}(\omega) = \int_0^\infty dE A(E) T^{(N)}(\omega, E) \quad (4.2)$$

$$T^{(N)}(\omega, E) = \left[ \Gamma(\omega, E) + (-J/N) \Gamma(\omega, E) (S \cdot \sigma) \Gamma(\omega, E) \right. \\ \left. + (-J/N)^2 \Gamma(\omega, E) (S \cdot \sigma) G(\omega, E) (S \cdot \sigma) \Gamma(\omega, E) \right]_{\alpha\alpha}^{00} \quad (4.3)$$

### § 5 励起された標的と電子の束縛状態

ここで (4.3) に出て来た,  $G_{\beta r}^{\ell m}(\omega)$  を考える。この関数のグラフは第 4 図のように孤立した黒丸の全然ないもの, 1 個だけあるもの, 2 個あるもの ..... のように分類出来る。孤立した黒丸の全然ないものを  $J_{\alpha\beta}^{\ell m}(\omega)$  とする。また孤立した黒丸とその右の孤立した黒丸との間の部分を, 左側の黒丸を



第 4 図

含めて  $K_{\alpha\beta}^{\ell m}(\omega)$  とする。この様に定義すると,

$$G_{\alpha\beta}^{\ell m}(\omega) = J_{\alpha\beta}^{\ell m}(\omega) + J_{\alpha r}^{\ell m}(\omega) K_{r\beta}^{nm}(\omega) + J_{\alpha r}^{\ell m}(\omega) [K^2(\omega)]_{r\beta}^{nm} + \dots \quad (5.1)$$

と書ける。ここで

$$K_{\alpha\beta}^{\ell m}(\omega) = A(\omega) \delta_{\alpha\beta} \delta_{\ell m} + B(\omega) \langle \ell | (S \cdot \sigma)_{\alpha\beta} | m \rangle \quad (5.2)$$

と定義すると

$$\begin{aligned} [(K(\omega))^n]_{\alpha\beta}^{\ell m} &= \frac{\delta_{\alpha\beta} \delta_{\ell m}}{2S+1} \left[ (S+1)(A+BS)^n + S(A-B(S+1))^n \right] \\ &+ \frac{\langle \ell | (S \cdot \sigma)_{\alpha\beta} | m \rangle}{2S+1} \left[ (A+BS)^n - (A-B(S+1))^n \right] \quad (5.3) \end{aligned}$$

となるので (5.1) は

$$G_{\alpha\beta}^{\ell m}(\omega) = \frac{1}{2S+1} \times \left[ \frac{J_{\alpha\beta}^{\ell m}(S+1) + J_{\alpha r}^{\ell n} \langle n | (S \cdot \sigma)_{r\beta} | m \rangle}{1 - \{A(\omega) + SB(\omega)\}} + \frac{S J_{\alpha\beta}^{\ell m} - J_{\alpha r}^{\ell n} \langle n | (S \cdot \sigma)_{r\beta} | m \rangle}{1 - \{A(\omega) - (S+1)B(\omega)\}} \right] \quad (5.4)$$

と書ける。あるいは、定義により

$$K_{\alpha\beta}^{\ell m}(\omega) = (-J/N) \langle \ell | (S \cdot \sigma)_{\alpha r} | m \rangle J_{\alpha\beta}^{nm}(\omega) \quad (5.5)$$

であることを使うと  $J(\omega)$  が (5.2) の  $A(\omega)$ ,  $B(\omega)$  を使って書けて

$$G_{\alpha\beta}^{\ell m}(\omega) = \frac{1}{(-J/N)(2S+1)} \times \left[ \frac{(A+SB)\{(S+1)\delta_{\alpha\beta}\delta_{\ell m} + \langle \ell | (S \cdot \sigma)_{\alpha\beta} | m \rangle\}}{S\{1-(A+SB)\}} - \frac{(A-(S+1)B)\{S\delta_{\alpha\beta}\delta_{\ell m} - \langle \ell | (S \cdot \sigma)_{\alpha\beta} | m \rangle\}}{(S+1)\{1-(S+1)B\}} \right] \quad (5.6)$$

ここで  $G_{\alpha\beta}^{\ell m}(\omega)$  はその添字の特殊なものについては既知であることに注意しよう。Nakajima<sup>11)</sup> はフェルミ真空に電子スピンの対  $a_{p\downarrow}^+ \alpha^+ - a_{p\uparrow}^+ \beta^+$  をつけ加え、系の応答を調べ、その最低の振動数とそれに対応する振幅が Yosida model における束縛エネルギーと Yoshimori 方程式<sup>12)</sup> の解を与えることを示した。Nakajima の対 Green 関数は外から電子を入れた途端に  $s$ - $d$  相互作用が働くとしたときの電子 Green 関数であると考えてもよいから

$$\sum_{\sigma} G_{\downarrow -\sigma}^{\uparrow \sigma}(\omega) - \sum_{\sigma} G_{\uparrow -\sigma}^{\downarrow \sigma}(\omega) \quad (5.7a)$$

を考えたと言ってもよい。ここで  $G_{\alpha\beta}^{\sigma\sigma'}(\omega)$  は (5.6) の右辺で  $\langle \ell |$  及び  $|m\rangle$  の代わりに Fermi 真空に  $\sigma$  及び  $\sigma'$  の局在スピンを付け加えた状態を使ったものと思えばよい。

(5.6) の一般式を使って (5.7a) を計算すると  $A + SB$  に比例する項が消え、もし

$$\sum_{\sigma} G_{\downarrow -\sigma}^{\uparrow \sigma}(\omega) + \sum_{\sigma} G_{\uparrow -\sigma}^{\downarrow \sigma}(\omega) \quad (5.7b)$$

を使えば  $A - (S+1)B$  に比例する項が消える。二つの項の分母は Green 関数を定義するのに使った状態には依らないから、分母が消えるという式は、Yosida model での 1 重項及び 3 重項束縛状態の永年方程式になっている。その方程式は Yoshimori によって与えられていて<sup>12)</sup>  $S = 1/2$  の場合は

$$\begin{cases} 1 - [A(\omega) - (S+1)B(\omega)] = 1 - [1 - (1-2x)^{1/2}] / [1 - \frac{1}{3}(1-2x)^{1/2}] \\ 1 - [A(\omega) + SB(\omega)] = 1 - [-1 + (1-2x)^{3/2}] / [5 + (1-2x)^{3/2}] \end{cases} \quad (5.8a)$$

$$(5.8b)$$

$$x = (J\rho/N) \log |(\omega - E)/D|$$

(5.8a) の右辺は  $x = (1/2)$  で消えるのに対し、(5.8b) の右辺は  $x$  のどんな実数値に対しても有限である。この (5.8a) の 0 点は Yosida model での 1 重項状態の束縛エネルギーを与えるが、今の場合は、励起された標的と入射電子との束縛状態で前者が 1 重項または 3 重項の散乱状態故、結局入射電子がスピンに束縛された状態である。すなわち、 $G_{\alpha\beta}^{\ell m}(\omega)$  の singularity からの寄与は、中間状態として新たな束縛状態と 1 個の電子の散乱状態を考えに入れたものである。この準位は標的のエネルギー  $E$  よりも  $|\tilde{E}| = D \exp(-N/2J\rho)$  だけ下のエネルギーと、それに散乱電子のエネルギーを加えたものである。したがって、 $E = |\tilde{E}|$  なら、 $\omega = 0$  の近傍にこの準位が表われ、この準位への遷移が電子の寿命への有限の寄与をする。したが

って、この寄与がどのような大きさのものであるかを概算してみよう。

まず、定義より (4.3) の  $\Gamma(\omega)$  の第 1 項は

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{\ell_m}(\omega) = \delta_{\ell_m} \delta_{\alpha\beta} + \dots$$

と書けるので、(4.3) の右辺の虚部は  $G(\omega, E)$  の虚部から来る。(5.8a)

の右辺が虚部をもつのは  $x > \frac{1}{2}$  の場合、すなわち

$$|\omega - E| < |\tilde{E}|$$

の場合で、このとき (5.8a) の右辺は純虚数になり、(5.6) の右辺第 2 項は  $\{|\tilde{E}| - (E - \omega)\}^{-1/2}$  に比例して発散するが、第 1 項はゆーくりと変化するのだから無視する。一方、局在 3 重項状態の状態密度は

$$\begin{aligned} A(E) &= \rho \Gamma^2(E - |\tilde{E}|) \\ &= \frac{|\tilde{E}| \left[ 1 - (2J\rho/N) \log |\tilde{E}/D| \right]^{1/2}}{E^2 \left[ 1 - (2J\rho/N) \log (E/D) \right]^{1/2}} \theta(E - |\tilde{E}|) \end{aligned} \quad (5.9)$$

と与えられるから<sup>3)</sup> (4.2), (4.3) 及び (5.6) から  $|\omega| \ll |\tilde{E}|$  のとき

$$\begin{aligned} \text{Im } T^{(N1)}(\omega) &\cong - \left( \frac{J}{N} \right) \frac{9}{8} \int_0^{\omega/|\tilde{E}|} dx \frac{1 - 2x}{(-2J\rho/N)x^{1/2} [\omega/|\tilde{E}| - x]^{1/2}} \\ &\quad \times \left[ 1 - (2J\rho/N) \log |\tilde{E}/D| \right]^{1/2} \\ &= \frac{-9}{16} \frac{\pi}{\rho} \left( 1 - \frac{\omega}{|\tilde{E}|} \right) \left[ 1 - (2J\rho/N) \log |\tilde{E}/D| \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (5.10)$$

を得る。

この右辺の最後の因子は  $|\tilde{E}|$  の定義により 0 である。この因子は Yosida 理論に出て来る  $\Gamma_p$  という関数の規格化条件から出て来るもので、厳密に 0 であるという保障はないが、少くとも弱結合の極限では小さくなるものであるから<sup>13)</sup> いわゆる unitarity limit の値よりはるかに小さい寄与である。

## § 6 討 論

この論文では、不純物スピンの周囲は Yosida model での 1 重項状態が実現していることを仮定して、 $t$ -行列の正常部分から電子の寿命への寄与を計算した。エネルギーの小さな入射電子 ( $\omega \ll |\tilde{E}|$ ) と 1 重項標的とからなる初期状態と同じエネルギーの中間状態は次の 2 種類がある。第 1 は標的が励起状態に上がり、その励起された標的のスピンの入射電子が 1 重項を作る場合であり、その寄与は前の節で議論した。第 2 は、標的が再び 1 重項基底状態にもどる場合で、このような過程はこの論文では考えなかったが、それから電子の寿命への寄与は、行列要素が  $|\omega| \rightarrow 0$  で消えることが判る。更に、(4.3) の右辺の  $\Gamma$  をその第 1 項のみで近似したが、その残りの項は、 $\omega - E \cong \tilde{E}$  の付近で異常性を示さないもので、弱結合の極限では無視してもよい。これら、この論文で示さなかったことについては、いずれ他の機会に議論したい。

## 文 献

- 1) K. Yosida ; Phys. Rev. 147 (1966), 223.
- 2) K. Kawamura ; Prog. Theor. Phys. 44 (1970), 47
- 3) K. Kawamura ; unpublished
- 4) D. J. Thouless ; The Quantum Mechanics of Many-Body Systems
- 5) H. Suhl ; Phys. Rev. 138 (1965), A515.
- 6) Y. Nagaoka ; Phys. Rev. 138 (1965), A1112 ; Prog. Theor. Phys. 37 (1967), 13.
- 7) D. R. Hamann ; Phys. Rev. 158 (1967), 570.
- 8) S. D. Silverstein and C. B. Duke ; Phys. Rev. 161 (1967), 456.
- 9) K. Kawamura ; Prog. Theor. Phys. 42 (1969), 1058.
- 10) H. Ishii and K. Yosida ; Prog. Theor. Phys. 38 (1967), 61.



川村 清

- 11) S.Nakajima ; Prog. Theor. Phys. 39 (1968), 1402.
- 12) A.Yoshimori ; Phys. Rev. 168 (1968), 493.
- 13) A.Yoshimori and K.Yosida ; Prog. Theor. Phys. 39  
(1968), 1413.